

Bilan d'énergie

Il nous a été demandé de calculer de faire le bilan énergétique. Sur base du flowsheet simplifié que nous avons complété en S2, nous avons déterminé que seulement trois réactions devaient être analysées, celles se produisant dans le bloc du four et dans le réacteur du reformage primaire, afin de réaliser le bilan :

- $CH_{4(g)} + 2O_{2(g)} \Rightarrow 2H_2O_{(g)} + CO_{2(g)}$ (Combustion de $CH_{4(g)}$, réaction complète)
- $CH_{4(g)} + H_2O_{(g)} \Rightarrow 3H_{2(g)} + CO_{(g)}$ (Reformage à vapeur de $CH_{4(g)}$, réaction à l'équilibre)
- $CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \Rightarrow H_{2(g)} + CO_{2(g)}$ (Reformage à vapeur de CH_4 , réaction à l'équilibre)

Nous avons commencé par calculer le ΔH de chaque équation.

Le bloc 'Four'

Dans ce bloc, nous avons traité les réactions suivantes :

- $CH_{4(g)} + H_2O_{(g)} \Rightarrow 3H_{2(g)} + CO_{(g)}$
- $CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \Rightarrow H_{2(g)} + CO_{2(g)}$

Nous allons d'abord nous intéresser à la première des deux. Nous savons que :

$$\Delta H_{react}^o = 3\Delta H_{H_2}^o + \Delta H_{CO}^o - (\Delta H_{CH_{4(g)}}^o + \Delta H_{H_2O_{(g)}}^o)$$

La réaction se passant dans un milieu à une température 'T' donnée, nous devons calculer les différences d'enthalpie molaire de formation des composés à cette température, sur base des données expérimentales. Pour cela, nous avons utilisé la relation suivante :

$$H_m^o(T_2) = \Delta H_{form}^o(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p dT \quad (1)$$

En faisant des recherches, nous avons trouvé l'expression pour ΔC_p en fonction de 'T' suivante :

$$\Delta C_p = A + \frac{BT}{1000} + C\left(\frac{T}{1000}\right)^2 + D\left(\frac{T}{1000}\right)^3 + \frac{E}{\left(\frac{T}{1000}\right)^2} \quad (2)$$

où T est la température du milieu et A,B,C,D,E sont des constantes propres à chaque composant (cfr Annexe).

De (1) et (2), on trouve facilement :

$$H_m^o(T_2) = \Delta H_{form}^o(T_1) + \int_{T_1}^{T_2} \left[A + \frac{BT}{1000} + C\left(\frac{T}{1000}\right)^2 + D\left(\frac{T}{1000}\right)^3 + \frac{E}{\left(\frac{T}{1000}\right)^2} \right] dT$$

ou encore

$$H_m^o(T_2) = \Delta H_{form}^o(T_1) + \left[AT + \frac{BT^2}{2 \cdot 10^3} + C\left(\frac{T^3}{3 \cdot 10^6}\right) + D\left(\frac{T^4}{4 \cdot 10^9}\right) + \frac{-10^6 E}{T} \right]_{T_1}^{T_2} \quad (3)$$

En remplaçant la valeur des ΔH^o dans (1) de chaque élément par leur valeur à la température 'T' obtenue avec (3), on peut facilement obtenir une expression pour ΔH_{react}^o .

Annexe

On connaît les valeurs de ΔH° pour les éléments suivants :

- $CH_{4(g)} \Rightarrow -74.6 \text{ kJ/mol}$
- $H_2O_{(g)} \Rightarrow -241.83 \text{ kJ/mol}$
- $CO_{(g)} \Rightarrow -110.53 \text{ kJ/mol}$
- $CO_{2(g)} \Rightarrow -393.51 \text{ kJ/mol}$

On connaît les constantes permettant d'utiliser la formule (2) suivantes :

| | A | B | C | D | E |
|--------------|---------|---------|----------|---------|--------|
| $CH_{4(g)}$ | -0.703 | 108.471 | -42.521 | 5.862 | 0.678 |
| $H_2O_{(g)}$ | 30.092 | 6.832 | 6.793 | -2.534 | 0.082 |
| $CO_{(g)}$ | 25.5675 | 6.0961 | 4.0546 | -2.6713 | 0.131 |
| $CO_{2(g)}$ | 34.2244 | 41.044 | -23.5297 | 5.5352 | -0.129 |